

## ЭЛЕКТРОННЫЕ СПЕКТРЫ ИОНОВ МАРГАНЦА В КРИСТАЛЛАХ $\text{LiNaSO}_4$

Солтобекова Н.С.

Институт физико-технических проблем и материаловедения НАН КР,  
Бишкек, Кыргызстан

E-mail: [nurjamalka\\_s@mail.ru](mailto:nurjamalka_s@mail.ru)

## ELECTRONIC RANGES OF IONS OF MANGANESE IN $\text{LiNaSO}_4$ CRYSTALS

Soltobekova N.S.

Institute of physics and technology problems and materials science NAN KR,  
Bishkek, Kyrgyzstan

Ranges of an optical and electronic paramagnetic resonance of an impurity ion of  $\text{Mn}^{2+}$  in  $\text{LiNaSO}_4$  crystals are investigated. It is established that  $\text{Mn}^{2+}$  ions replace  $\text{Na}^+$  cations in the crystal lattice.

К настоящему времени накоплен большой экспериментальной материал по изучению оптических спектров кристаллов, содержащих примеси  $d^5$ -ионов, однако расшифровка и теоретическая интерпретация этих спектров при современном состоянии теории далеко не всегда оказывается возможной. Это связано с трудностью развития многоэлектронной теории твёрдого тела, которая учитывала бы реальную структуру кристалла.

Нами проведено исследование ионных кристаллов  $\text{LiNaSO}_4$ , содержащих примесь двухвалентного марганца. Изучены кристаллы выращенные методом изотермического испарения из водных растворов. Исследованы спектры оптического поглощения и электронного парамагнитного резонанса.

Чистый кристалл не имеет полос поглощения в исследованной области. У кристаллов с примесью марганца наблюдается широкая полоса поглощения с максимумом около  $35700\text{см}^{-1}$  (280нм) и слабый перегиб около  $45400\text{см}^{-1}$  (220нм). Сопоставление литературными данными [1] позволяет приписывать эти полосы к переходам от основного уровня  ${}^6A_{1g}$  к уровням  ${}^4T_{1g}$  и  ${}^4A_{2g}(F)$ ,  ${}^4T_{1g}(F)$ ,  ${}^4T_{2g}(F)$  соответственно.

Спектр ЭПР кристалла  $\text{LiNaSO}_4:\text{Mn}^{2+}$  состоит из пяти линий, соответствующая пяти переходам в ионе  $\text{Mn}^{2+}$ ; каждая из этих пяти линий расщеплена на шесть компонент сверхтонкой структуры. При отклонении на несколько градусов от ориентации  $H||a$ ,  $H||b$  и  $H||c$  спектр значительно усложняется, так как каждая линия расщепляется. Расщепление линий на несколько компонент свидетельствует о том, что ионы  $\text{Mn}^{2+}$  в кристалле  $\text{LiNaSO}_4$  расположены в нескольких магнитно неэквивалентных положениях, различающихся ориентаций в кристаллической решетке.

В структуре  $\text{LiNaSO}_4$  катионы  $\text{Mn}^{2+}$  находятся в восьмерном, а катионы  $\text{Li}^+$  находятся в тетраэдрическом окружении образованных ионами  $\text{O}^{2-}$ . Учитывая, что предпочтительное замещение примесными ионами матричных ионов возможно при отличии ионных радиусов замещаемого и замещающего ионов не более чем на 15%, можно предположить, что ионы  $\text{Mn}^{2+}$  ( $R_{\text{Mn}^{2+}} = 0,91 \text{ \AA}$ ) скорее замещают катионы  $\text{Na}^+$  ( $R_{\text{Na}^+} = 0,98 \text{ \AA}$ ) в решетке чем катионы  $\text{Li}^+$  ( $R_{\text{Li}^+} = 0,68 \text{ \AA}$ ).

1. Stout I.W., I.Chem Phys., V.31, P.709; V.33, P.303(1959), (1960).

## **МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЛЯ РАЗРАБОТКИ НОВЫХ МЕТОДОВ НЕРАЗРУШАЮЩЕГО КОНТРОЛЯ**

Уцын Г.Е.

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,  
Томск, Россия

E-mail: [uge23@rambler.ru](mailto:uge23@rambler.ru)

## **MATHEMATICAL MODELING FOR THE DEVELOPMENT OF NEW METHODS OF NONDESTRUCTIVE TESTING**

Utsyn G.E.

National research Tomsk Polytechnic University, Tomsk, Russia

A new approach to the analysis of experimental data for non-destructive testing, based on the effect of A. transformations is presented. The results of mathematical modeling of wave process in an environment with a given geometric size are shown.

Актуальная проблема дефектоскопии в технологических структурах, которые состоят из гетерогенной диэлектрических материалов, такие как бетоны, может быть решена с применением математического моделирования. Известно, что наличие в бетоне дефекта приводит к изменению амплитудно-частотной характеристики электрического сигнала при возбуждении его импульсной нагрузкой. На основе разработанной физико-математической модели электрического отклика с использованием аппарата механики сплошных сред теоретически рассчитаны параметры электрического сигнала из образцов бетона. Результаты математического моделирования сопоставляются с лабораторными экспериментами.

На основе этих исследований ведется разработка неразрушающих методов контроля структурных и механических характеристик гетерогенных материалов. Хорошее соответствие характера изменения теоретических и экспериментальных данных при наличии в образце дефекта является свидетельством